

BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan analisis terhadap hasil penelitian absorpsi CO dan CO₂ oleh amina menggunakan metode DFT yang telah dilakukan diperoleh kesimpulan bahwa absorpsi CO dan CO₂ oleh amina (monoetanolamina (MEA), 2-(2-aminoetoksi)etanol (DGA), dietanolamina (DEA), diisopropanolamina (DIPA), 2-amino-2-metillpropanol (AMP), trietilamina, trietanolamina) melibatkan reaksi kimia yang dalam fasa gas relatif berlangsung tidak spontan dan adanya pelarut air dapat meningkatkan kespontanan reaksi dalam absorpsi CO yang ditandai dengan perubahan nilai ΔH_{rx} dari 80,525 - 105,385 kkal/mol menjadi (-29,246) - (-34,671) kkal/mol dan ΔG_{rx} dari 58,830 - 105,385 kkal/mol menjadi (-18,739) - (-23,838) kkal/mol dan kespontanan reaksi dalam absorpsi CO₂ yang ditandai dengan perubahan nilai ΔH_{rx} dari (-7,673) - (-30,399) kkal/mol menjadi sebesar (-23,528) - (-34,049) kkal/mol dan ΔG_{rx} dari 13,816 - (-9,226) kkal/mol menjadi (-0,023) - (-10,522) kkal/mol. Reaksi kimia yang terlibat dalam absorpsi CO oleh amina menghasilkan amina terprotonasi dan HCOO⁻, sedangkan reaksi yang terlibat dalam absorpsi CO₂ oleh amina primer dan sekunder menghasilkan kompleks karbamat dan H₂O sedangkan oleh amina tersier menghasilkan kompleks amina terprotonasi dan HCO₃⁻. Hasil penelitian juga menunjukkan suhu tidak mempengaruhi reaksi kimia dalam absorpsi CO oleh amina yang ditandai dengan nilai ΔH_{rx} dan ΔG_{rx} yang relatif sama, tetapi suhu sedikit mengurangi kespontanan reaksi dalam absorpsi CO₂ oleh amina yang ditandai dengan ΔG_{rx} yang lebih positif pada suhu tinggi.

5.2 Saran

Pada penelitian selanjutnya disarankan untuk melakukan studi komputasi absorpsi CO dan CO₂ oleh amina yang lain dengan menggunakan basis set yang berbeda.